

算法对混沌体系逃逸率的影响*

赵海军 杜孟利†

(中国科学院理论物理研究所, 北京 100080)
(2006 年 10 月 18 日收到, 2006 年 12 月 7 日收到修改稿)

以 Hénon-Heiles 体系为例, 研究算法对混沌体系运动轨道和逃逸率计算结果的影响. 比较了新发现的四阶辛算法和一种非辛的高阶算法得到的结果. 发现两种算法给出的轨迹之间的距离随时间增大, 增加的速度可以作为体系相空间混沌的度量. 通过跟踪大量数的粒子轨迹, 提取出了逃逸率随体系能量的变化. 发现由两种算法得到的逃逸率相互符合得很好.

关键词: 逃逸率, Hénon-Heiles 体系, 辛算法

PACC: 0545, 4660D

1. 引言

近些年来, 混沌体系的逃逸问题引起人们了较多的兴趣. 1990 年, Bauer 和 Bertsch 研究了规则和混沌的弹子球体系的逃逸, 发现混沌弹子球体系的逃逸遵循指数规律, 而规则弹子球体系并不遵守^[1]. Legrand 和 Sornette 对运动场弹子球的研究也得出了指数规律的结论^[2]. Doron 等报告了肘形腔中微波混沌散射的指数塌缩规律^[3]. 上面的研究结果暗示混沌体系逃逸遵守指数规律可能和体系无关, 而只和体系的混沌特性有关. 本文研究 Hénon-Heiles 体系 (HH 体系)^[4]的逃逸问题. 与前面研究过的弹子球体系不同, 无法对 Hénon-Heiles 体系写出关于粒子运动的简单映射. 必须用数值方法解哈密顿运动方程, 跟踪粒子随时间的运动轨迹. 我们应用了两种高精度算法以便比较. 第一种算法是改进的隆格-库塔方法, 已为人们熟知多年, 但它不是辛的. 另一种四阶辛算法是最近才被发现的. 辛算法可以保持所有庞加莱 (Poincaré) 不变量, 被认为在长时间跟踪轨道时比非辛的算法更具优越性^[5]. 我们将揭示对于混沌轨道, 两种算法给出的具有同一初始点的两条数值轨道之间的距离随时间指数增加. 我们用这一结果作为体系混沌程度的度量, 发现和用 Lyapunov 指数方法得到的结论一致. 我们用两种算法跟踪了大量粒子轨迹, 证实了 Hénon-Heiles 体系的逃逸也遵

守指数规律. 从两种算法提取出的随体系能量变化的逃逸率符合很好.

2. HH 模型

首先对 HH 体系作一个简单介绍. 该体系的哈密顿量是

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + U(x, y),$$

$$U(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + x^2y - \frac{1}{3}y^3, \quad (1)$$

x 和 y 表示粒子的坐标, p_x, p_y 表示对应的动量. 我们已令粒子的质量为 1. HH 体系是个著名的混沌模型. 研究表明, 在能量 E 从 0 增加到大约 0.1 的范围, 体系运动是规则的; 体系能量再增加, 相空间混沌运动的区域逐渐扩大^[6-10]. 当体系能量接近 $E = 1/6$ 时, 相空间几乎全部都是混沌的了.

图 1 给出了 U 的等值线. 图 1 中有三个鞍点 P_1 ($x = 0, y = 1$), P_2 ($-\sqrt{3}/2, -1/2$) 和 P_3 ($\sqrt{3}/2, -1/2$). 所有能量低于 $1/6$ 的等值线都是封闭的, 运动被限制于封闭线内. 能量为 $1/6$ 的等值线构成三角形 $P_1P_2P_3$. 能量高于 $1/6$ 的等值线不是封闭的, 在三个顶角处有开口. 能量 $E_{th} = 1/6$ 是体系的阈能值. 如果粒子能量高于阈能值 $E_{th} = 1/6$, 就可以从开口处逃出 HH 体系的近似三角形区域. 我们通过每个鞍点可画一条和逃逸方向垂直的直线, 如图 1 中所

* 国家自然科学基金 (批准号 90403028) 资助的课题.

† E-mail: duml@itp.ac.cn

示 A_1B_1 , A_2B_2 以及 A_3B_3 . 通过 P_1 点的线 A_1B_1 平行于 x 轴. 我们定义由三条不相交的等值线和三条直线所形成的范围为势阱.

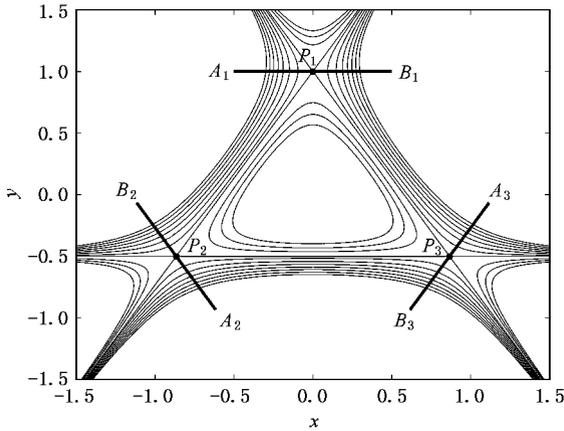


图 1 HH 体系的等势图 (P_1 , P_2 和 P_3 为三个鞍点位置)

对于弹子球体系的研究表明,混沌体系逃逸过程中势阱中的粒子数应当随时间指数衰减,

$$N(t) = N(0)\exp(-t\alpha), \quad (2)$$

其中 α 为逃逸率,其大小依赖于体系能量 E . 对于 HH 体系,我们同样期待这样的指数规律.

3. 不同算法

模拟计算就是在势阱里放很多粒子,跟踪每个粒子随时间运动的轨迹,统计势阱中粒子数随时间的变化,从而提取出逃逸率.本文使用了两种不同的算法求解每个粒子的运动.第一个是变步长的 5—6 阶 Runge-Kutta-Fehlberg 方法(RKF 方法)^[11].注意这个常用方法并不是辛的,可以设置相对误差和绝对误差两个参数控制局部精度.我们在所有计算中每一步的绝对误差参数固定在 10^{-9} .

另一个算法是四阶的而且保辛,最近才由 Chin 和 Chen 发现^[12].设 ϵ 代表时间步长,该算法的步进程序是

$$\begin{aligned} p_1 &= p(i) + \frac{1}{6}\epsilon F(q(i)), \\ q_1 &= q(i) + \frac{1}{2}\epsilon p_1, \\ p_2 &= p_1 + \frac{4}{6}\epsilon \tilde{F}(q_1), \\ q(i+1) &= q_1 + \frac{1}{2}\epsilon p_2, \\ p(i+1) &= p_2 + \frac{1}{6}\epsilon F(q(i+1)). \end{aligned} \quad (3)$$

注意在中间一步力函数有一个修正

$$\tilde{F} = F + \frac{1}{48}\epsilon^2 \nabla(|F|^2).$$

以下用 CC 表示该算法.

4. 不同算法结果比较

首先我们比较不同算法对轨道的影响.图 2(a) 和 (b) 中粒子的起始条件相同 (c) 和 (d) 的相同 (e) 和 (f) 的相同.图 2(a) (c) 和 (e) 是用 RKF 算法得到的轨迹,在计算中相对容忍误差为 10^{-6} .图 2(b), (d) 和 (f) 是用 CC 算法得到的轨迹,时间步长为 0.04. (a) 和 (b) 中粒子的初始位置坐标都是 ($x=0, y=0.15$), 能量为 0.18, 动量沿 x 轴.我们看到,两种算法给出的两条轨迹短时间很接近,长时间后两条轨迹有很大的差异. (a) 的跟踪时间从 0 到 280, 粒子正好逃逸 (d) 的跟踪时间从 0 到 140, 粒子刚逃逸.两种算法得到的逃逸时刻相差一倍. (c) 和 (d) 的粒子初始位置坐标为 (0, 0.67), 能量为 0.17, 动量沿 x 轴, 跟踪的时间都是从 0 到 200. 可以看出 (c) 中的粒子已经从阱中逃出, 但是 (d) 中的粒子还未逃出. (e) 和 (f) 中的粒子的初始位置坐标为 (0, 0.6), 能量为 0.2, 动量沿 x 轴, 跟踪时间从 0 到 90. 可以看出 (e) 中粒子从 P_1 的开口处逃逸, 但 (f) 中粒子却从 P_3 的开口处逃逸. 图 2 反映了长时间跟踪混沌运动轨迹的困难, 即使每前进一步, 计算的局部精度都很高, 但长时间后不同算法的差异也会明显表现出来.

为了定量描述由两种算法得到轨迹的差异, 设由同一初始点开始, q_i 是算法 i 得到的粒子的轨迹. 由两种算法给出的轨迹之间的距离是

$$d(t) = |q_1(t) - q_2(t)|, \quad (4)$$

我们定义

$$\beta = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T - T_1} \ln \left(\frac{d(T)}{d(T_1)} \right), \quad (5)$$

其中 T_1 大于零. 如果 d 随时间指数增加, 则有

$$d(t) = C \exp(\beta t), \quad (6)$$

其中 C 是正的常数. 因此, β 的大小描述了两种算法给出的轨迹之间的距离随时间增加的快慢.

给定初始点, 就可以计算出对应的 β . 对于体系的任何能量 E , 我们随机选取 N 个初始点, 用 $d_j(t)$, $j=1, \dots, N$ 表示每一个初始点对应的由两种算法得到的轨迹距离, 用 $\bar{d}(t) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N d_j(t)$ 表示平均距离. 把 $\bar{d}(t)$ 应用在 (5) 式右边, 计算得到的

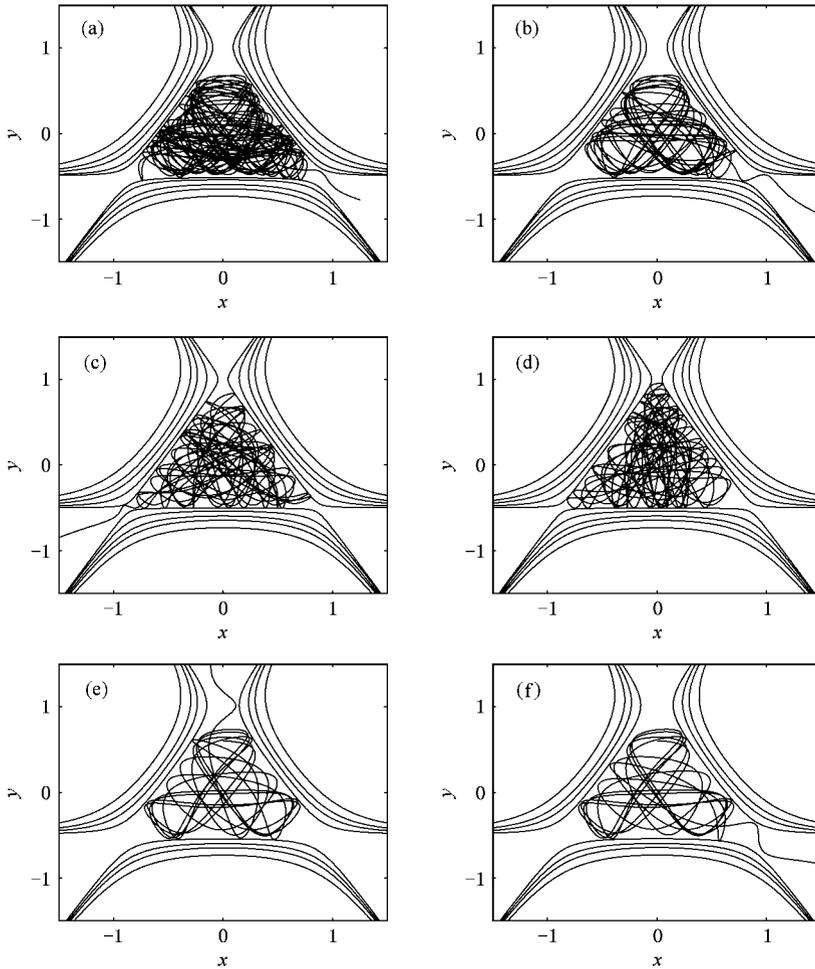


图2 HH 体系中粒子用不同算法得到的轨迹 (a)(c)和(e)使用 RKF 方法,相对误差参数 10^{-6} 。(b)(d)和(f)使用 CC 算法,步长 0.04。粒子的初始动量都沿 x 方向。(a)和(b)中粒子的初始位置坐标为 $(x=0, y=0.15)$, 能量为 0.18, 跟踪时间分别为 280 和 140。(c)和(d)中粒子的初始位置坐标为 $(0, 0.67)$, 能量为 0.17, 跟踪的时间为 0 到 200。(e)和(f)中粒子的出发点为 $(0, 0.6)$, 能量为 0.2, 跟踪时间为 0 到 90

结果用 $\bar{\beta}$ 表示。则 $\bar{d}(t)$ 和 $\bar{\beta}$ 是能量 E 的函数, 已与初始点无关。我们在 Hénon-Heiles 体系的计算中取 $N = 1000$, RKF 算法相对容忍误差取为 10^{-6} , CC 算法步长为 0.04。图 3 给出了几个典型能量值对应的 $\bar{d}(t)$ 随时间 t 的变化曲线。注意图 3 中纵坐标是 $\bar{d}(t)$ 的自然对数值。能量 $E = 0.16$ 的线是一条直线, 表明此时 $\bar{d}(t)$ 随时间的变化是指数的。能量 $E = 0.12$ 的线基本上是一条直线, 有明显的振荡。更低能量时, $\bar{d}(t)$ 随时间的增加很缓慢。

我们计算 $\bar{\beta}$ 时取 T 为 106.76, T_1 为 3.14。图 4(a) 圆点线给出 $\bar{\beta}$ 随能量 E 的变化。从图 4 中看到, 在能量小于 0.1 时, $\bar{\beta}$ 值较小, 随能量的变化也很缓慢。能量大于 0.1 时, $\bar{\beta}$ 随能量增加而急剧增大。从图 4(a) 得出的关于体系规则运动和混沌运动随体

系能量的变化与已知的结果^[4, 43] 完全一致。这说明 $\bar{\beta}$ 可以用来度量体系的混沌。另外, 对比图 4 和文献 [14] 的图 4 (已复制到图 4(b)) 我们发现, 图 4(a) 中的曲线和 Lyapunov 指数随能量的变化曲线相似。 $\bar{\beta}$ 与 Lyapunov 指数间的定量关系还有待进一步研究。

以上计算 $\bar{\beta}$ 时, 是先计算每点的距离随时间的函数, 对距离平均后得到 $\bar{d}(t)$, 再求 $\bar{\beta}$ 。作为对比, 另一种做法是, 对每点的距离先应用(5)式, 得到对应每个轨道的 β , 再平均。用这种方法计算出的平均 β 在图 4(a) 中用三角形表示。和第一种算法的结果(圆点)比较, 我们发现, 第二种算法给出的关于系统混沌程度的描述没有本质的差别, 但第一种算法给出的平均 β 值比第二种算法大, 因而对混沌更敏感。

我们现在转向 Hénon-Heiles 体系逃逸率的计

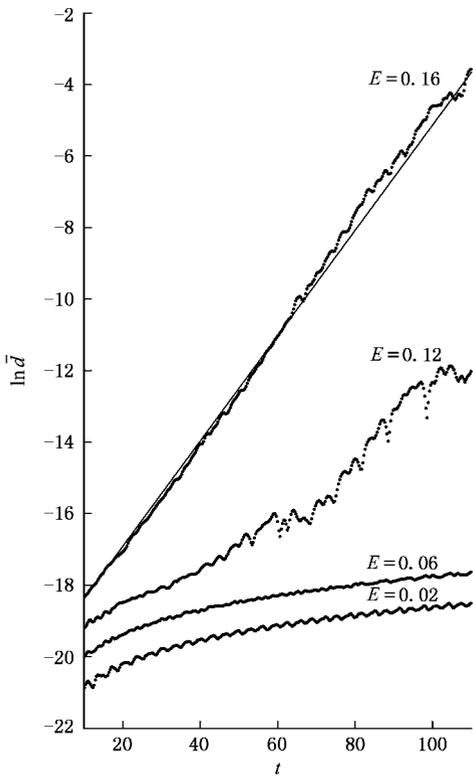


图3 两种算法给出的两个轨道之间的平均距离 \bar{d} 随时间变化的曲线.图中从上到下的曲线分别对应体系能量为 0.16、0.12、0.06 和 0.02 时的情况.能量为 0.16 时的拟合直线也在图中)

算.在势阱中一开始放置 $N = 15326$ 个粒子,粒子的能量都是 0.19.能量大于 $1/6$ 时,因为运动是混沌的,粒子在阱中的分布和统计力学中微正则系综相同,如文献 [13] 中 (15.15) 式所示:

$$\Psi(p, q) = \frac{\delta(E - H(p, q))}{\int dp \int dq \delta(E - H(p, q))}. \quad (7)$$

我们使用 RKF 方法解每个粒子的运动方程,同时跟踪 15326 个粒子的演化.计算时 RKF 方法的相对容忍误差为 10^{-8} ,时间每增加 $\Delta t = 0.628$ 记录一次阱内的粒子数.图 5 给出了粒子数随时间的变化,我们看到阱内粒子数的对数和时间的关系几乎是一条直线.

从 (2) 式我们得到

$$\ln N(t) = \ln N(0) - \alpha t. \quad (8)$$

因此,逃逸率和图 5 这样的曲线的切线斜率只相差一个负号.我们用下面的公式计算逃逸率:

$$\alpha = - \frac{\ln N(t + \Delta t) - \ln N(t - \Delta t)}{2\Delta t}. \quad (9)$$

在图 5 中画出了 $t = 30.772$ 处的切线,计算出的逃逸率为 0.0169.

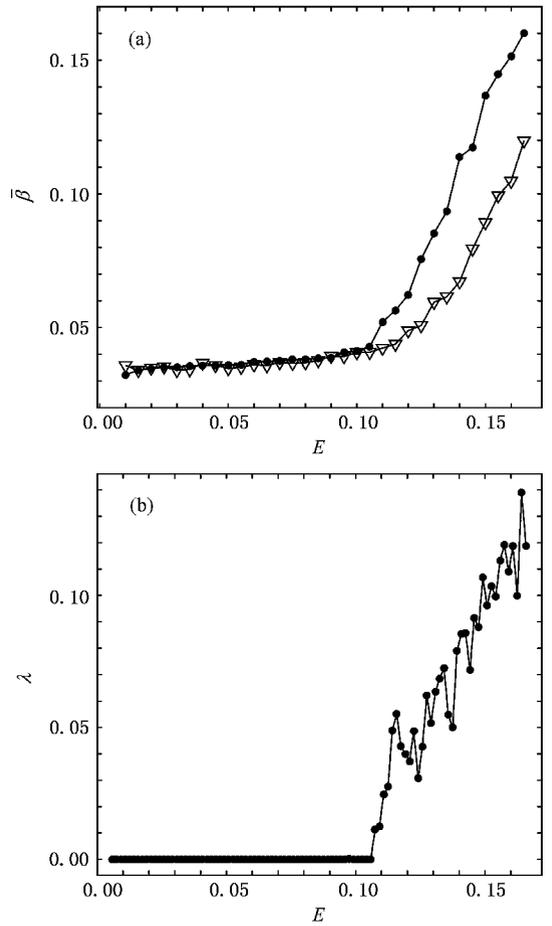


图4 (a) $\bar{\beta}$ 随能量的变化.圆点是用第一种方法得到的结果,即先对不同的轨道求距离的平均,然后再用(5)式求 $\bar{\beta}$.三角形是用第二种方法得到的结果,即先对每一轨道用(5)式得到 $\bar{\beta}$,然后对不同的轨道求平均得到 $\bar{\beta}$.(b) Lyapunov 指数随能量的变化曲线(从文献 [14] 复制).注意图中连线只是为了清晰

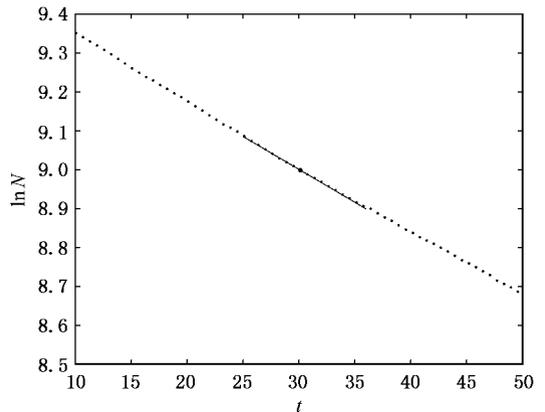


图5 势阱中粒子数随时间的变化(点是用 RKF 方法计算的结果,相对误差设定为 10^{-8} ,实线是 $t = 30.772$ 处的切线)

我们用 RKF 方法和 CC 方法计算了逃逸率作为能量的函数. 计算时, RKF 方法设定相对误差为 10^{-8} , CC 算法的步长为 0.04, 公式中 $t = 30.772$. 图 6 是计算出的逃逸率和能量的关系. 可以看到两种算法得到的结果符合很好, Hénon-Heiles 体系的逃逸率随能量增加而增加.

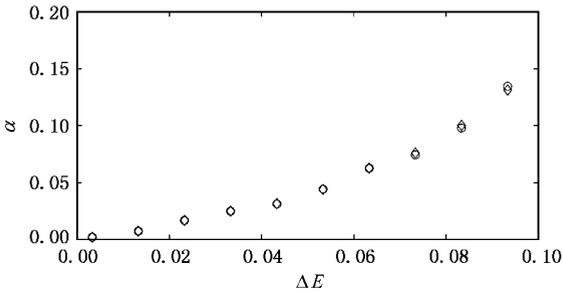


图 6 逃逸率随能量的变化(圆代表 RKF 方法, 相对容忍误差为 10^{-8} , 菱形表示 CC 方法, 步长 0.04, 计算时 (9) 式中 $t = 30.772$, $\Delta E = E - 1/6$ 是阈上的能量)

5. 结 论

混沌运动的最重要特点之一就是随时间放大轨道的初始差异. 我们在研究 Hénon-Heiles 体系逃逸问题过程中, 发现从同一点出发的轨道, 如果用两种高精度算法计算, 计算出的两个轨道间的距离随时间指数增长. 增长的速度可以用来度量体系的混沌. 由于两种算法给出的由同一点出发的两个轨道的距离增加很快, 长时间后两个轨道所表示的粒子状态相差就很大. 尽管如此, 两种算法得到的逃逸率却符合很好. 这可能因为逃逸率和大量轨迹的统计性质有关. 这个问题还有待进一步研究. 我们的研究还表明 Hénon-Heiles 体系的逃逸也很好遵守指数规律. 另外, 在计算混沌体系的逃逸率时, 我们发现辛算法并没有表现出特别的优势.

- [1] Bauer W, Bertsch G F 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 2213
- [2] legrand O, Somette D 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 2172
- [3] Doron E, Smilansky U, Frenkel A 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 3072
- [4] Hénon M, Heiles C 1964 *Astro. J.* **69** 73
- [5] Feng K, Qin M Z 2003 *Symplectic Geometric Algorithms for Hamiltonian Systems* (Zhejiang Science and Technology Press, Hangzhou) (in Chinese) [冯 康、秦孟兆 2003 哈密顿系统的辛几何算法(浙江科学技术出版社 杭州)]
- [6] Berdichevsky V L, Alberti M V 1991 *Phys. Rev. A* **44** 858
- [7] Gustavson F G 1966 *Astro. J.* **71** 670
- [8] Noid D W, Marcus R A 1977 *J. Chem. Phys.* **67** 559
- [9] Zheng Z G, Hu G, Zhang J Y 1995 *Phys. Rev. E* **52** 3440
- [10] Wang P J, Wu G Z 2005 *Acta Physica Sinica* **54** 2545 (in Chinese) [王培杰、吴国祯 2005 物理学报 **54** 2545]
- [11] Press M C, W H, Teukolsky S A, Vetterling W T, Flannery B P 1988 *Numerical recipes in c: the art of scientific computing* (Cambridge University Press, Cambridge).
- [12] Chin S A, Chen C R, arXiv:astro-ph/0304223.
- [13] Gutzwiller M 1992 *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, New York)
- [14] J. Barrow D, Levin J, arXiv:nlm, CD/0303070 v1

Escaping problem in the Hénon-Heiles system and numerical algorithms^{*}

Zhao Hai-Jun Du Meng-Li[†]

(*Institute of Theoretical Physics ,Chinese Academy of Sciences ,Beijing 100080 ,China*)

(Received 18 October 2006 ; revised manuscript received 7 December 2006)

Abstract

We study the trajectories and escaping problem in the Hénon-Heiles system using a new fourth order symplectic algorithm and the Runge-Kutta-Fehlberg algorithm. Starting from the same initial point ,we found the distance between the two numerical trajectories calculated by the two algorithms increases exponentially in time in the chaotic region . We show this result can be used to measure chaos . We also calculate the escape rate as a function of energy above threshold in the Hénon-Heiles system . The results calculated with two different algorithms agree very well .

Keywords : escape rate , Hénon-Heiles , symplectic algorithm

PACC : 0545 , 4660D

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No.90403028).

[†] E-mail :duml@itp.ac.cn